

物理老化具有显著的尺度效应，聚合物膜在物理老化时存在特征厚度。当薄膜的厚度大于特征厚度时，老化进程与厚度无关；当薄膜的厚度小于特征厚度时，薄膜越薄老化进程越快。(2) 物理老化并非单一的自由体积自松弛过程，气体介质的扩散过程在薄膜厚度小于特征厚度时对老化进程具有加速效应。(3) 导致这种尺度效应的主要原因在于，老化由扩散过程和体松弛共同影响。薄膜厚度大于特征厚度时，扩散过程对老化进程影响微弱，老化由与厚度无关的体松弛主导，而薄膜厚度小于特征厚度时，老化进程由扩散过程和体松弛共同主导，其中扩散过程是厚度相关的。(4) 所提出的模型与实验数据吻合相当好。

国家自然基金项目(10672095)资助

关键词：尺度效应，物理老化，聚合物薄膜

MS28

CCTAM2009-003741

非比例循环载荷作用下晶体塑性行为的离散位错动力学模拟

李振环，侯传涛，黄敏生，胡莉莉

华中科技大学力学系，武汉 430074

利用二维离散位错动力学方法，对单晶及多晶材料在拉—压组合非比例循环载荷作用下的应力—应变响应进行了模拟。结果表明：(1) 无论是单晶还是多晶材料，循环载荷作用下的应力—应变响应都呈现了明显的附加强化现象；(对于多晶，循环应力—应变响应存在显著的晶粒尺寸效应；(3) 在双向非比例载荷作用下，晶体循环塑性变形显著地依赖于载荷比，呈现出复杂的应变强化或应变软化现象。

关键词：尺度效应，离散位错模拟，微循环塑性，载荷路径

MS28

CCTAM2009-003742

原子/离散位错耦合材料模拟方法及应用

曲绍兴^{*}，周昊飞^{*}，William A. Curtin⁺

* 浙江大学航空航天学院，杭州 310027，squ@zju.edu.cn

⁺Division of Engineering, Brown University, Providence, RI 02912 USA

发展了一种“有限温度下动态原子/离散位错耦合材料模拟方法”，进行跨原子、微观和宏观尺度的含缺陷晶体材料力学性能研究。在原子区域，采用分子动力学方法并选择合适的温控方法；连续区域中离散位错模型与动态有限元相结合；通过原子/连续区域界面及交叠带原子的位移实现不同空间区域信息的传递。该方法具有(1)保持系统平衡温度；(2)获得正则热涨落；(3)吸收原子区域内产生并传播到界面上的波等能力，被证明是一种非常有效的多尺度材料模拟方法。利用上述多尺度材料模拟方法解决了关于 f.c.c 铝裂尖李晶形成理论预测与实验观察之间的矛盾。研究表明，在 f.c.c 金属中存在着李晶与位错滑移两种塑性变形机制及其转变，这两种机制的竞争是率相关的，在相对低的载荷和加载率下，位错滑移主导金属塑性变形。本研究还基于 Rice-Beltz 提出的二维解析 Peierls 模型，发展了一新的解析模型，用于研究李晶与位错滑移之间的转变。国家自然科学基金资助(10702062，

50890174)

关键词：多尺度耦合，离散位错，李晶，塑性变形

MS28

CCTAM2009-003743

多尺度计算数值界面条件的设计与分析

唐少强

北京大学力学系，北京 10087

简要介绍了晶格系统计算中两种高精度的数值界面条件：时间历史积分方法(用于桥接多尺度方法和拟谱多尺度方法)和速度界面条件。在此基础上，进一步探讨下述两个问题。

(1) 双原子系统的速度界面条件与稳定性分析。晶格通常由多种原子组成，相应地，其中的原子振荡模式也包括声学支和光学支。通过对反射系数加以控制，设计出相应的速度界面条件，保证声学支模态和光学支模态的反射系数都小于 1。然而，数值计算表明，这样的数值界面条件并不稳定。进而对附加了数值界面条件的(有限)单原子链进行细致的分析。通过完整的特征值问题研究发现，反射系数法给出不正确的稳定性条件。在反射系数法认定为稳定的参数区域内，得到了指数增长的表面模态。表面模态常常成对出现，其特征值非常接近，特征向量分别为空间对称和反对称的，这些模态完全不是傅立叶模态形式的，而傅立叶模态不构成解空间里的基导致反射系数法失效。还给出了一个简化的判别稳定性的低阶多项式。数值计算验证了我们的理论分析。此外，在实际计算中(无界域问题或多尺度计算问题)，准确界面条件的一个小小的扰动通常会带来一个很小然而实部为正的特征值，该特征值在长时间计算中会导致不稳定性。我们也对半无限链、连续的波动问题进行了类似的讨论。

(2) 在应用问题中，粗网格区域对原子计算区域的作用不只是把原子振荡无反射地传播出去，波动也会从粗网格区域传入原子计算区域。例如，热运动(热浴)的一种处理方法就是把相应的原子振荡加载到数值界面上。设计了一种双向无反射边界条件，有效处理外传的原子振荡，同时正确加载内传的振荡。注意到，文献上多数热浴都是直接加载到原子链的所有原子，这会导致原子链波动和热运动的混淆。提出的双向无反射边界条件可以解决这一困难，进而为非零温度下的准确多尺度计算提供基础。

关键词：多尺度计算，界面条件，稳定性

MS28

CCTAM2009-003744

自适应的二维集团统计热力学模拟

谭浩^{*,+}，汪海英^{*}，夏蒙莽^{*,**}，柯孚久^{*,++}，白以龙^{*}

* 中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室，北京 100080

⁺ 中国科学院研究生院，北京 100039

^{**} 北京大学物理系，北京 100087

⁺⁺ 北京航空航天大学应用物理系，北京 100083

提出了一种自适应的集团算法：如果误差值达到细化准则的要求，就在原子集团中引入新的结点来改变集团的大小，从而使应变梯度较大区域的计算误差减小。其次，

通过对几个具体的二维晶格计算模拟, 来验证自适应计算对 CST 精度的提高。国家自然科学基金资助 (10702062, 50890174)

关键词: 集团统计热力学, 自适应, 细化

MS28

CCTAM2009-003745

Cu-Zr 纳米丝应力诱导马氏体相变和高超弹性效应

成琴, 吴恒安, 王宇, 王秀喜

中国科学技术大学近代力学系, 合肥 230026,
wuhua@ustc.edu.cn

运用分子动力学方法讨论了由应力诱导的 Cu-Zr 纳米丝中的马氏体相变现象和高超弹性效应。在单轴拉应力作用下, {100} 孪生边界在拉伸端成核并逐步沿纳米丝长度方向扩展, 并最终使 Cu-Zr 纳米丝完成从体心立方 (BCC) 相到体心四方 (BCT) 相的马氏体相变。卸载体心四方 (BCT) 相的 Cu-Zr 纳米丝, 可以发现高达 45% 的拉伸应变能够通过可逆马氏体相变完全回复到初始零应力状态, 大大高于传统块体形状记忆合金 5% ~ 10% 的应变值, 这表明 Cu-Zr 合金纳米丝可能作为一种新的功能元件, 在纳米机电系统 (NEMS) 中有广泛的应用前景。从 50K 下 Cu-Zr 纳米丝拉伸加载和卸载的应力应变曲线, 可以看出加载曲线有两个应力平台, 两个屈服点和两个线性段, 其中一段为 Cu-Zr 表面重构阶段, 该段为体心立方 (BCC) 相到体心四方 (BCT) 相的马氏体相变段, 一个 BCT 相变成核点和一个 BCT 相纳米丝屈服点。国家“973”基础研究项目 (2006CB300404) 和国家自然科学基金重点项目 (10632080) 资助

关键词: Cu-Zr 纳米丝, 马氏体相变, 高超弹性

MS28

CCTAM2009-003746

外载作用下单壁碳管的拉曼振动频率

张田忠, 李六连

上海市应用数学和力学研究所, 上海大学低维碳材料和器件原理研究所, 上海 200072,
tchang@staff.shu.edu.cn

采用非线性“杆一簧”模型分析系统研究了 RBM 和 G-band 等拉曼振动频率在轴向、径向和扭转作用下的手性、尺寸相关性。结果表明 RBM 和 G-band 振动频率对碳纳米管的结构有很强的依赖性, 随着碳纳米管的直径和手性角的变化, 振动频率会发生变化, 特别是对于尺寸较小的碳纳米管, 这种影响更加的明显。结果同时表明, 在某些情况下 RBM 和 G-band 振动频率与所受载荷承近似线性关系, 可方便用于测定碳纳米管所受载荷; 而在另外一些情况下, RBM 和 G-band 振动频率随外载变化表现出强非线性关系。所得结果和部分已有的实验结果具有很好的一致性。

MS28

CCTAM2009-003747

微系统封装高密度互连界面行为的实验和微极模型研究

张燕*, 樊靖郁⁺

* 中瑞联合微系统集成技术中心, 上海大学机电工程与自

动学院, 上海 200072, yzhang@shu.edu.cn

⁺ 上海市应用数学和力学研究所, 上海大学, 上海 20007

针对导电胶连接所形成的高密度互连界面材料和尺度特征, 以界面内代表性微结构为着眼点, 采用包含尺度参数的微极理论, 建立多尺度界面失效分析模型。为精确描述尺度细小的微结构受载变形, 以高阶表达式得到对界面区微观变形场的描述。同时在微观层次引入内聚力模型, 表征微结构内异质材料接触面之间可能出现的分层损伤萌生和发展的微观失效过程。然后, 采用均匀化方法得到基于微结构的界面宏观响应。将多尺度界面失效理论模型以有限元方法实现, 对各向异性导电胶形成的芯片互连界面进行数值模拟。同时, 实验测量芯片互连体系的受载变形特征。分析互连界面受载变形后的应力应变特性, 从而得到在热循环过程中, 应力(包括微极理论引入的偶应力)随温度加载的响应过程, 进而得到对连接可靠性的预测。国家自然科学基金 (10702037), 上海市浦江人才计划 (08PJ14054) 和上海市教委科研创新项目资助 (09YZ0)

关键词: 微系统封装, 高密度互连, 界面行为, 微极模型, 可靠性

MS28

CCTAM2009-003748

非均匀材料的多尺度微观形态理论

张朝晖, 庄苗

北京清华大学航天航空学院工程力学系, 北京 100084,
zhuangz@mail.tsinghua.edu.cn

对于材料设计, 模拟材料宏观响应的同时, 考虑微结构尺度物理机制及相互作用非常重要。然而, 直接模拟微结构的所有细节的计算成本是很高的, 且当前的许多均匀化连续体模型并不能准确的捕捉到材料的内在变形机制, 尤其是材料发生局部化与破坏时。为了克服这些传统理论的局限性, 在各个不同尺度引入表征变形的运动学变量, 建立了多尺度连续体理论框架。利用连续体—微结构功率等效方法, 推导出系统的连续耦合微分控制方程及相应的边界条件, 每个控制方程代表一个特定的尺度以及与宏观尺度的相互作用, 并计及多尺度微观应力及微观偶应力。再将与微观应力相关的表征各个尺度物理机制的本构方程引入, 利用多尺度的屈服函数表现材料的非弹性行为, 这些特定微结构尺度内的屈服函数, 通过同样的内变量集耦合在一起。仅考虑单尺度(代表性体积单元尺度)非均匀变形时, 微观形态理论可分解为应变梯度理论。微观形态理论可利用传统的有限元方法进行求解。利用两尺度连续体模型来分析包含孔洞金属材料的破坏, 将此理论计算结果与拉伸样本微结构的直接数值模拟结果比较, 说明本模型能捕捉主要的物理机制且计算成本低。

关键词: 多尺度微观形态理论, 微结构, 非均匀材料, 局部化, 有限元

MS28

CCTAM2009-003749

原子模拟镁单晶拉伸变形行为

亓宏刚, 郭雅芳